Allgemeinste Formulierung der Ausgleichungsrechnung nach der Methode der kleinsten Quadratsummen

Von RUDOLF BÖCK, Genf (früher DGFI München)

I.

Die Ausgleichungsverfahren nach der Methode der kleinsten Fehlerquadratsummen sind im Begriffe, im Zeichen der Automatisierung von Rechenvorgängen immer größere Bedeutung anzunehmen.

Während bis vor kurzem in erster Linie Geodäten und Astronomen die damit verbundene umfangreiche Rechenarbeit auf sich nahmen und auch einen erheblichen Anteil der Literatur hervorbrachten, beginnen nun auch andere Teilgebiete der angewandten Mathematik die Ausgleichungsrechnung zur Lösung ihrer Aufgaben heranzuziehen. Die bisherigen Darstellungen der Probleme sind meist, den Gegebenheiten entsprechend, auf die Rechnung mit Handrechenmaschinen abgestellt und lassen die Anwendung in modernen Rechenanlagen mühsamer erscheinen, als sie in Wirklichkeit ist.

Die Schematik der Behandlung wird vom Standpunkt der Programmierung in anderer Hinsicht gefordert als von dem des Formularrechners: Ein Ausgleichungsprogramm soll in der Lage sein, möglichst viele verschiedene Probleme durch den gleichen Satz von Routinen zu lösen.

In dieser Richtung will die vorliegende Arbeit ein Schritt sein. Die Grundlagen der Methode der kleinsten Quadratsummen werden nicht erörtert (s. dazu [3], [4], [6]), ebensowenig wie die angegebenen Formeln grundlegend Neues enthalten.

II.

In einer Programmbibliothek darf man gewöhnlich Subroutinen für die geläufigen Matrizenoperationen erwarten. Die Ausgleichungsrechnung ist zudem für eine kurze und übersichtliche Darstellung in Matrixnotation bestens geeignet. Für fast alle vorkommenden Beziehungen wird daher diese Schreibweise benutzt. Die in der europäischen Literatur übliche Darstellung von Matrizen durch deutsche Buchstaben (z. B. [3]) wird zugunsten der neueren Gewohnheit fallengelassen, Matrizen wie beliebige andere mathematische oder physikalische Begriffe nach Bedarf zu benennen; die Bezeichnung von Buchstaben in halbfetter Antiqua ist [1] entnommen und lehnt sich an die vor kurzem in dieser Zeitschrift veröffentlichte Arbeit von LINKWITZ zum gleichen Thema [10] an, wenn auch in der Wahl der Symbole letztere Veröffentlichung nicht mehr berücksichtigt werden konnte. Die Bezeichnung von Matrizen vom Typ $(n; 1)$, also von einspaltigen Matrizen, als Vektoren unter Zuordnung kleiner Buchstaben wird beibehalten. Transponierte Matrizen werden durch Superskript T gekennzeichnet. Über die benötigten einfachsten Regeln der Matrizenschreibweise informiert [3]. Näheres in [1] oder [9].

III.

Fehlerfortpflanzung.

Wir nehmen eine Beobachtungsreihe $b_1 \ldots b_n$ an, zu der die Gewichte $g_1 = \frac{1}{\sigma_1 \sigma_1} \ldots$ $\ldots g_n = \frac{1}{\sigma_n \sigma_n}$ gehören (σ = mittlerer oder Standard-Fehler).

Zur linearen Funktion der b_i

$$f = \sum_\nu a_\nu b_\nu \tag{1'}$$

gehört der Standardfehler σ_f, wobei

$$\sigma_f \sigma_f = \sum_\nu a_\nu a_\nu \sigma_\nu \sigma_\nu . \tag{1a'}$$

Nehmen wir mehrere lineare Funktionen an

$$f_i = \sum_\nu a_{i\nu} b_\nu \tag{2'}$$

mit den sich aus (1a') ergebenden Standardfehlern und definieren nun eine lineare Funktion dieser f_i zu

$$g = \sum_\varrho b_\varrho f_\varrho = \sum_\varrho b_\varrho \sum_\nu a_{\varrho\nu} b_\nu \tag{3'}$$

so erhalten wir den hierzu gehörigen Fehler nur, wenn wir die Verbindung mit der ursprünglichen Beobachtungsreihe herstellen, wie es in (3') bereits geschehen ist. Da man nach Umstellung erhält

$$g = \sum_\nu b_\nu \sum_\varrho b_\varrho a_{\nu\varrho}$$

ergibt sich

$$\sigma_g \sigma_g = \sum_\nu \sigma_\nu \sigma_\nu \left(\sum_\varrho b_\varrho a_{\nu\varrho}\right) \left(\sum_\varrho b_\varrho a_{\nu\varrho}\right) . \tag{3a'}$$

Wir schreiben die bisher beschriebenen Vorgänge in Matrixnotation an; aus den Gewichten zum Beobachtungsvektor b wird eine (diagonale) Gewichtsmatrix G_b gebildet, der Grund dafür ergibt sich später. Die Inverse zur Gewichtsmatrix, die nach obiger Definition der Gewichte in der Diagonale die Elemente $\sigma_i \sigma_i$ stehen hat, nennen wir Korrelations- oder Fehlermatrix G_b^{-1}. Im speziellen Fall der b, wo die Korrelationsmatrix wieder Diagonalform annimmt, sprechen wir von unkorrelierten oder statistisch unabhängigen Beobachtungen. Wir verwenden dieselbe Gleichungsnumerierung wie oben und erhalten aus

$$f = \mathbf{a}^T \mathbf{b} \tag{1}$$

für das Fehlerquadrat

$$G_f^{-1} = \mathbf{a}^T \mathbf{G}_b^{-1} \mathbf{a} . \tag{1a}$$

Die Erweiterung auf

$$\mathbf{f} = \mathbf{A}\, \mathbf{b} \tag{2}$$

liefert

$$\mathbf{G}_\mathbf{f}^{-1} = \mathbf{A}\, \mathbf{G}_\mathbf{b}^{-1} \mathbf{A}^T , \tag{2a}$$

wobei der Typ der Matrizen nun allgemein gehalten ist.

Weiter gilt für eine Funktion von $\mathbf{f}$ aus (2)

$$\mathbf{g} = \mathbf{B}\, \mathbf{f} = \mathbf{B}\, \mathbf{A}\, \mathbf{b} \tag{3}$$

die Korrelationsmatrix

$$\mathbf{G}_\mathbf{g}^{-1} = (\mathbf{B}\mathbf{A})\, \mathbf{G}_\mathbf{b}^{-1} (\mathbf{B}\mathbf{A})^T = \mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{G}_\mathbf{b}^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{B}^T = \mathbf{B}\mathbf{G}_\mathbf{f}^{-1} \mathbf{B}^T . \tag{3a}$$

womit nun die Bedeutung der quadratischen Korrelationsmatrix erbracht ist: (2a) sagt über die Fehler der Komponenten von $\mathbf{f}$ mehr aus als (2a'), welches nur die Diagonalelemente von $\mathbf{G}_\mathbf{f}^{-1}$ in (2a) beschreibt. Die Kenntnis der gesamten Korrelationsmatrix ist gerade ausreichend, um die Fehler linearer Funktionen der $\mathbf{f}$ zu bestimmen, ohne auf die ursprünglichen, nichtkorrelierten Beobachtungen zurückzugehen.

Wir fassen zusammen:

Die lineare Transformation eines Vektors

$$\mathbf{x} = \mathbf{M}\mathbf{y} \tag{4}$$

zieht eine entsprechende Umformung der zugehörigen Fehlermatrix nach sich:

$$\mathbf{G}_{\mathbf{x}}^{-1} = \mathbf{M}\,\mathbf{G}_{\mathbf{y}}^{-1}\,\mathbf{M}^{T}. \tag{4a}$$

Es ist noch wichtig, auf die Bedeutung der Elemente der $\mathbf{G}^{-1}$ hinzuweisen. Aus der Statistik (s. [2]) ergibt sich, daß das Element ik einer solchen Matrix den mittleren Wert des Produktes $\sigma_i \sigma_k$ (= Kovarianz) angibt, wenn σ_i und σ_k die dem i-ten und k-ten Element des untersuchten Vektors zugeordneten mittleren Fehler sind. Daß ein Diagonalelement gleich dem Quadrat des entsprechenden mittleren Fehlers („Varianz") ist, ergibt sich daraus von selbst. Beachten wir aber, daß wir, um diese Bedeutung zu wahren, an keiner Stelle einen Skalarfaktor zu Gewichts- oder Fehlermatrizen zulassen dürfen, sondern die zu Anfang eingeführte Definition von Gewichten und Elementen der Fehlermatrizen beibehalten müssen. Siehe hierzu auch [10], S. 160ff.

Man schreibt häufig, um den Mittelwert des Produktes zweier Fehler anzudeuten, die Form $\overline{\sigma_i \sigma_k}$.

Die Gewichtsmatrizen spielen eine nicht so leicht überschaubare Rolle wie die Fehlermatrizen. Wir definieren sie lediglich als Inverse der letzteren und werden später sehen, daß damit tatsächlich teilweise eine formale Verwendung als Gewichtsmatrix möglich ist. Voraussetzung ist natürlich, daß $\mathbf{G}^{-1}$ nichtsingulär ist. Siehe hierzu die Anmerkungen am Ende von Abschnitt VII.

IV.

Im Fall einer nichtlinearen Funktion ist das Vorgehen analog (4) und (4a), wenn nur vorher durch Taylorentwicklung eine linearisierte Form an der entsprechenden Stelle hergestellt wurde.

Um auch die Differentiation unter bestimmten Voraussetzungen in Matrizenschreibweise durchführen zu können, definieren wir die Ableitung einer Funktion eines Vektors nach diesem Vektor als diejenige Matrix, die als Element ik die Ableitung der Komponente i der Funktion nach der Komponente k des Vektors enthält. Es ist leicht zu zeigen, daß im Fall einer linearen Funktion die Ableitung die Form annimmt

$$\frac{d\mathbf{f}}{d\mathbf{x}} = \frac{d(\mathbf{A}\mathbf{x})}{d\mathbf{x}} = \mathbf{A}. \tag{5}$$

Nur in dieser Definition lassen wir Differentiationen nach Vektoren zu.

Für den Fall der Fehlerfortpflanzung bei nichtlinearer Funktion erhalten wir nun, wenn

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) \tag{6}$$

die linearisierte Darstellung

$$\mathbf{f}(\mathbf{x} + d\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \frac{d\mathbf{f}}{d\mathbf{x}}\,d\mathbf{x} \tag{6a}$$

und daraus

$$\mathbf{G}_{\mathbf{f}}^{-1} = \left(\frac{d\mathbf{f}}{d\mathbf{x}}\right) \mathbf{G}_{\mathbf{x}}^{-1} \left(\frac{d\mathbf{f}}{d\mathbf{x}}\right)^{T}. \tag{6b}$$

Wir sehen, daß (4a) lediglich einen Sonderfall von (6b) für eine lineare Abhängigkeit $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ darstellt.

(wird fortgesetzt)

Allgemeinste Formulierung der Ausgleichungsrechnung nach der Methode der kleinsten Quadratsummen

Von Rudolf Böck, Genf (früher DGFI München)

(Fortsetzung von Seite 45)

V.

Bevor wir den allgemeinsten Fall in Angriff nehmen, behandeln wir kurz die beiden klassischen Fälle der Ausgleichungsrechnung und beginnen mit dem Problem der „Ausgleichung nach vermittelnden Beobachtungen".

Hierbei liegt bekanntlich ein Beobachtungsvektor $\mathbf{b}$ mit bekannter (diagonaler) Korrelationsmatrix $\mathbf{G}_\mathbf{b}^{-1}$ vor und soll einer (zunächst linearen) Funktion eines Vektors $\mathbf{x}$ von Unbekannten gleichgesetzt werden. Diese Funktion drücken wir aus durch eine Matrix $\mathbf{A}$ und ein konstantes Additionsglied $\mathbf{c}$.

Die Gleichsetzung kann bei Überbestimmung nur erfolgen, wenn die Beobachtungen durch Verbesserungen $\mathbf{v}$ korrigiert werden und die „Fehlergleichungen" lauten:

$$\mathbf{A}\,\mathbf{x} + \mathbf{c} + \mathbf{b} + \mathbf{v} = \mathbf{0}\,. \tag{7}$$

Dabei sollen die $\mathbf{x}$ so bestimmt werden, daß

$$M = \mathbf{v}^T \mathbf{G}_\mathbf{b}\, \mathbf{v} = \text{Minimum}\,. \tag{7a}$$

Aus (7) nehmen wir $\mathbf{v} = -(\mathbf{A}\,\mathbf{x} + \mathbf{b} + \mathbf{c})$ und setzen in (7a) ein:

$$M = (\mathbf{A}\,\mathbf{x} + \mathbf{b} + \mathbf{c})^T \mathbf{G}_\mathbf{b} (\mathbf{A}\,\mathbf{x} + \mathbf{b} + \mathbf{c})\,. \tag{8}$$

Die Erfüllung von (7a) führen wir herbei, wenn wir M einzeln nach den Komponenten von $\mathbf{x}$ partiell differenzieren und jeden dieser Differentialquotienten gleich Null setzen. Nach unserer in IV. eingeführten Definition können wir schreiben

$$\frac{\mathrm{d}M}{\mathrm{d}\mathbf{x}} = 0\,. \tag{9}$$

Die eingeführte Ableitungsregel ist anwendbar, obwohl in M ein $\mathbf{x}^T$ auftritt: Wir differenzieren zunächst nach $\mathbf{x}$ und betrachten $\mathbf{x}^T$ als zweite Variable. Nach dieser differenzieren wir, wenn wir M durch M^T ersetzt haben, welche zwei Größen natürlich identisch sind. Diese zweite Differentiation ist dann der ersten gleichlautend und das Ergebnis ist (nach Transposition, um eine Vektorgleichung zu erhalten):

$$\left(\frac{\mathrm{d}M}{\mathrm{d}\mathbf{x}}\right)^T = 2\,\mathbf{A}^T \mathbf{G}_\mathbf{b} (\mathbf{A}\,\mathbf{x} + \mathbf{b} + \mathbf{c}) = \mathbf{0} \tag{10}$$

womit die bekannten Normalgleichungen beschrieben sind. Schematisch lautet die Lösung

$$\mathbf{x} = -(\mathbf{A}^T\mathbf{G_b}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{G_b}(\mathbf{b}+\mathbf{c}) \tag{11}$$

was, in (7) und (8) eingesetzt, auch die $\mathbf{v}$ und M zu berechnen gestattet.
Auch die als Rechenproben viel benutzten Beziehungen

$$M = \mathbf{v}^T\mathbf{G_b}\mathbf{v} = (\mathbf{b}+\mathbf{c})^T\mathbf{G_b}(\mathbf{A}\mathbf{x}+\mathbf{b}+\mathbf{c}) = -(\mathbf{b}+\mathbf{c})^T\mathbf{G_b}\mathbf{v} \tag{12}$$

leiten sich aus (7a), (8) und (10) ohne weiteres ab. Sie entsprechen in Summenschreibweise den Formen

$$M = [gvv] = [gll] - [x_i[ga_il]] = -[glv] \tag{12'}$$

wobei $[gll] - [x_i[ga_il]] \equiv [gll \cdot n]$, denn die Produktsumme aus Lösungen und rechten Seiten der Normalgleichungen ist gleich dem Reduktionsbetrag, der bei der üblichen Gaußschen Elimination an $[gll]$ angebracht wird.

Es bleibt noch übrig, die sich aus (11) abzulesende lineare Abhängigkeit zwischen den $\mathbf{x}$ und $\mathbf{b}$ zu benutzen, um eine Korrelationsmatrix für die $\mathbf{x}$ abzuleiten:

$$\begin{aligned}\mathbf{G_x}^{-1} &= [(\mathbf{A}^T\mathbf{G_b}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{G_b}]\,\mathbf{G_b}^{-1}[(\mathbf{A}^T\mathbf{G_b}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{G_b}]^T = \\ &= (\mathbf{A}^T\mathbf{G_b}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{G_b}\mathbf{G_b}^{-1}\mathbf{G_b}\mathbf{A}(\mathbf{A}^T\mathbf{G_b}\mathbf{A})^{-1} = \\ &= (\mathbf{A}^T\mathbf{G_b}\mathbf{A})^{-1}.\end{aligned} \tag{13}$$

Auch der Funktion $\mathbf{b}+\mathbf{v}$ ist eine Korrelationsmatrix zugeordnet.

Wir stellen $\mathbf{b}+\mathbf{v}$ als lineare Funktion der $\mathbf{b}$ dar, was aus (7) und (11) ergibt:

$$\mathbf{b}+\mathbf{v} = -(\mathbf{A}\mathbf{x}+\mathbf{c}) = \mathbf{A}(\mathbf{A}^T\mathbf{G_b}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{G_b}(\mathbf{b}+\mathbf{c}) - \mathbf{c} \tag{14a}$$

$$\mathbf{G}^{-1}_{(\mathbf{b}+\mathbf{v})} = \mathbf{A}(\mathbf{A}^T\mathbf{G_b}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T. \tag{14}$$

Die Quadrate der mittleren Fehler der ausgeglichenen Beobachtungen bzw. der ermittelten Unbekannten erhält man in bekannter Weise aus den Diagonalelementen der Korrelationsmatrizen durch Multiplikation mit dem Faktor $M/(n_\mathbf{b} - n_\mathbf{x})$ ($n_\mathbf{b}$ = Zahl der Beobachtungen, $n_\mathbf{x}$ = Zahl der Unbekannten). Sind die eingeführten mittleren Fehler der $\mathbf{b}$ statistisch richtig gewählt, so ist ein mittleres $M = n_\mathbf{b} - n_\mathbf{x}$ zu erwarten (χ^2-Verteilung). Der Rang der beiden Matrizen $\mathbf{G_x}^{-1}$ und $\mathbf{G}^{-1}_{(\mathbf{b}+\mathbf{v})}$ ist offensichtlich höchstens der von $\mathbf{A}$, nämlich $n_\mathbf{x}$. Siehe hierzu die Anmerkungen im Anschluß an (35).

Für den Fall nichtlinearer Abhängigkeit

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) + \mathbf{b} + \mathbf{v} = \mathbf{o} \tag{7b}$$

erhält man einen Ansatz (7) mit $\mathbf{c} = \mathbf{f}(\bar{\mathbf{x}})$, $\mathbf{A} = d\mathbf{f}/d\mathbf{x}$ wenn $\bar{\mathbf{x}}$ eine Näherung für $\mathbf{x}$ ist, die auf beliebigem Weg vorherbestimmt ist.

An Stelle von $\mathbf{x}$ bestimmt man nun ein $\Delta\mathbf{x}_\nu$ und es ist $\bar{\mathbf{x}}_{\nu+1} = \bar{\mathbf{x}}_\nu + \Delta\mathbf{x}_{\nu+1}$. Der Index gibt dabei die Iterationszahl an, da die Bestimmung von $\Delta\mathbf{x}$ mehrmals wiederholt werden muß, um der Änderung von $\mathbf{A}$ mit $\mathbf{x}$ Rechnung zu tragen. Über Ausgangskriteria des Iterationszyklus siehe Abschnitt VII.

VI.

Wir gehen über zum zweiten Standardfall der Geodäsie, der „Ausgleichung nach bedingten Beobachtungen".

Die Bedingungsgleichungen seien formuliert durch

$$\mathbf{B}(\mathbf{b}+\mathbf{v}) + \mathbf{c} = \mathbf{0} \tag{15}$$

wobei $\mathbf{B}$ die spezielle Form der Bedingungen charakterisiert und die übrigen Buchstaben die Bedeutung wie in V. haben. $\mathbf{G_b}^{-1}$ wird wieder als bekannt vorausgesetzt. Die Minimumsbedingung ist die gleiche wie oben:

$$M = \mathbf{v}^T\mathbf{G_b}\mathbf{v} = \text{Minimum}. \tag{7a}$$

Bekanntlich löst man das Problem durch Einführen der Lagrangeschen Multiplikatoren $\mathfrak{a}$ und erweitert (9) in folgender Form

$$M = \mathfrak{v}^T \mathfrak{G}_\mathfrak{b} \mathfrak{v} + 2\mathfrak{a}^T(\mathfrak{B}(\mathfrak{b}+\mathfrak{v})+\mathfrak{c}). \tag{16}$$

Die partiellen Ableitungen von M nach den Elementen von $\mathfrak{v}$ müssen Null gesetzt werden und nach (5) erhalten wir:

$$\left(\frac{\mathrm{d}M}{\mathrm{d}\mathfrak{v}}\right)^T = 2\mathfrak{G}_\mathfrak{b}\mathfrak{v} + 2\mathfrak{B}^T\mathfrak{a} = 0. \tag{17}$$

Daraus folgt

$$\mathfrak{v} = -\mathfrak{G}_\mathfrak{b}^{-1}\mathfrak{B}^T\mathfrak{a} \tag{17a}$$

und über (15)

$$\mathfrak{a} = (\mathfrak{B}\mathfrak{G}_\mathfrak{b}^{-1}\mathfrak{B}^T)^{-1}(\mathfrak{B}\mathfrak{b}+\mathfrak{c}), \tag{18}$$

wobei die Elemente von $\mathfrak{B}\mathfrak{b}+\mathfrak{c}$ gewöhnlich als Widersprüche bezeichnet werden.

Die Lösung, nämlich $\mathfrak{v}$, ist bereits durch (18) und (17a) bestimmt. Wir schreiben die Korrelationsmatrix der $\mathfrak{a}$ an, die sich nach (18) ergibt:

$$\mathfrak{G}_\mathfrak{a}^{-1} = [(\mathfrak{B}\mathfrak{G}_\mathfrak{b}^{-1}\mathfrak{B}^T)^{-1}\mathfrak{B}]\,\mathfrak{G}_\mathfrak{b}^{-1}[(\mathfrak{B}\mathfrak{G}_\mathfrak{b}^{-1}\mathfrak{B}^T)^{-1}\mathfrak{B}]^T = (\mathfrak{B}\mathfrak{G}_\mathfrak{b}^{-1}\mathfrak{B}^T)^{-1}. \tag{19}$$

Aus (17a) ergibt sich weiter

$$M = \mathfrak{v}^T\mathfrak{G}_\mathfrak{b}\mathfrak{v} = \mathfrak{a}^T\mathfrak{B}\mathfrak{G}_\mathfrak{b}^{-1}\mathfrak{B}^T\mathfrak{a} \equiv \mathfrak{a}^T\mathfrak{G}_\mathfrak{a}\mathfrak{a} \tag{19a}$$

und als Rechenprobe noch

$$M = \mathfrak{v}^T\mathfrak{G}_\mathfrak{b}\mathfrak{v} = \mathfrak{a}^T(\mathfrak{B}\mathfrak{b}+\mathfrak{c})$$

(19a) zeigt, daß für den Fall der $\mathfrak{a}$ die Einführung der Inversen zur Korrelationsmatrix als Gewichtsmatrix gerechtfertigt ist (siehe hierzu [10]).

Aus einer Darstellung von $\mathfrak{b}+\mathfrak{v}$ als lineare Funktoin von $\mathfrak{b}$

$$\mathfrak{b}+\mathfrak{v} = \mathfrak{b} - \mathfrak{G}_\mathfrak{b}^{-1}\mathfrak{B}^T\mathfrak{a} = (\mathfrak{E} - \mathfrak{G}_\mathfrak{b}^{-1}\mathfrak{B}^T(\mathfrak{B}\mathfrak{G}_\mathfrak{b}^{-1}\mathfrak{B}^T)^{-1}\mathfrak{B})\,\mathfrak{b} + \text{const.} \tag{20a}$$

($\mathfrak{E}$ = Einheitsmatrix)

ergibt sich die Korrelationsmatrix der $\mathfrak{b}+\mathfrak{v}$

$$\mathfrak{G}_{(\mathfrak{b}+\mathfrak{v})}^{-1} = \mathfrak{G}_\mathfrak{b}^{-1} - \mathfrak{G}_\mathfrak{b}^{-1}\mathfrak{B}^T(\mathfrak{B}\mathfrak{G}_\mathfrak{b}^{-1}\mathfrak{B}^T)^{-1}\mathfrak{B}\mathfrak{G}_\mathfrak{b}^{-1}. \tag{20}$$

Aus $\mathfrak{B}\mathfrak{G}_{(\mathfrak{b}+\mathfrak{v})}^{-1} = 0$ ergibt sich, daß $\mathfrak{G}_{(\mathfrak{b}+\mathfrak{v})}^{-1}$ singulär ist mit einem Rangdefekt, der gleich ist der Anzahl der Zeilen von $\mathfrak{B}$, also gleich der Anzahl $n_\mathfrak{f}$ der Bedingungsgleichungen (15). Siehe hierzu die Anmerkungen zu Gleichung (35).

Die Anzahl der Freiheitsgrade für M ist ebenfalls gleich $n_\mathfrak{f}$.

Im Fall nichtlinearer Bedingungsgleichungen $\mathfrak{f}(\mathfrak{b}+\mathfrak{v})+\mathfrak{c}=0$ stellt man die Linearform durch Differentiation an der Stelle $\mathfrak{b}$ her und erhält

$$\mathfrak{B}\mathfrak{v} + \mathfrak{f}(\mathfrak{b}) + \mathfrak{c} = 0 \quad \text{mit} \quad \mathfrak{B} = \frac{\mathrm{d}\mathfrak{f}}{\mathrm{d}\mathfrak{b}}. \tag{21}$$

Sind die für eine passende Lösung gestellten Kriteria (s. Abschnitt VII.) jedoch streng, so genügt ein einmaliges Durchrechnen mit diesem Ansatz nicht, da ja die $\mathfrak{v}$ nicht wirklich differentiell klein sind. Auch die Lösung des Problems der bedingten Beobachtungen erfordert bei nichtlinearen Bedingungsgleichungen in Strenge ein iteratives Vorgehen. Man schreibt

$$\mathfrak{B}\mathfrak{v}_{\nu+1} + \mathfrak{f}(\mathfrak{b}+\mathfrak{v}_\nu) + \mathfrak{c} - \mathfrak{B}\mathfrak{v}_\nu = 0 \tag{22}$$

mit

$$\mathfrak{B} = \left[\frac{\mathrm{d}\mathfrak{f}}{\mathrm{d}\mathfrak{b}}\right]_{\mathfrak{b}=\mathfrak{b}+\mathfrak{v}_\nu}.$$

Damit ist eine (15) entsprechende Form gefunden. An die Stelle von $\mathfrak{B}\mathfrak{b}+\mathfrak{c}$ tritt $\mathfrak{f}(\mathfrak{b}+\mathfrak{v}_\nu)+\mathfrak{c}-\mathfrak{B}\mathfrak{v}_\nu$. Diese Größe, die dem ursprünglichen Widerspruch gleichsteht, geht mit wachsender Iterationszahl nicht gegen Null, sondern gegen den Wert $-\mathfrak{B}\mathfrak{v}$.

VII.

Wir formulieren nun die allgemeinste Form des Ausgleichungsproblems. Ausgehend von einem Satz von Bedingungsgleichungen zwischen Unbekannten $\Delta \mathbf{x}$, Beobachtungen $\mathbf{b}$ und Verbesserungen $\mathbf{v}$ schreiben wir direkt die Linearform an:

$$\mathbf{f} = \mathbf{A}\,\Delta\mathbf{x} + \mathbf{B}\,\mathbf{v} + \mathbf{c} = 0 \tag{23}$$

wobei wir bereits wissen, daß $\mathbf{c} = \mathbf{c}(\mathbf{b})$ und daß im Fall nichtlinearer Bedingungsgleichungen $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{b} + \mathbf{v}) = 0$ die Matrizen die Bedeutung haben

$$\mathbf{A} = \left[\frac{d\mathbf{f}}{d\mathbf{x}}\right]_{\mathbf{x}=\bar{\mathbf{x}}_\nu} \quad \text{und} \quad \mathbf{B} = \left[\frac{d\mathbf{f}}{d\mathbf{b}}\right]_{\mathbf{b}=\mathbf{b}+\mathbf{v}_\nu}$$

und außerdem $\mathbf{c} = \mathbf{c}(\bar{\mathbf{x}}_\nu, \mathbf{b} + \mathbf{v}_\nu)$ (vgl. (7b) und (21)).

Zusätzlich zu (23) ist wieder $M = \mathbf{v}^T \mathbf{G}_\mathbf{b} \mathbf{v}$ zum Minimum zu machen. Die Ähnlichkeit der Aufgabe mit der Formulierung (7) ist auffallend, lediglich ist $\mathbf{v}$ durch $\mathbf{B}\mathbf{v}$ ersetzt. Daß rein formal nur $\mathbf{G}_\mathbf{b}^{-1}$ und $\mathbf{G}_\mathbf{b}$ durch die aus (4) und (4a) folgenden Matrizen $\mathbf{G}_\mathbf{B}^{-1} = \mathbf{B}\,\mathbf{G}_\mathbf{b}^{-1}\mathbf{B}^T$ und $\mathbf{G}_\mathbf{B} = (\mathbf{B}\,\mathbf{G}_\mathbf{b}^{-1}\mathbf{B}^T)^{-1}$ zu ersetzen sind, bedarf jedoch erst der Ableitung. Wir führen die Lagrangeschen Multiplikationen ein und schreiben

$$M = \mathbf{v}^T \mathbf{G}_\mathbf{b} \mathbf{v} + 2\,\boldsymbol{\alpha}^T (\mathbf{A}\,\Delta\mathbf{x} + \mathbf{B}\,\mathbf{v} + \mathbf{c})\,. \tag{24}$$

Die Differentiation nach $\mathbf{v}$ liefert (s. auch (17)),

$$\left(\frac{dM}{d\mathbf{v}}\right)^T = 2\,\mathbf{G}_\mathbf{b}\mathbf{v} + 2\,\mathbf{B}^T\boldsymbol{\alpha} = 0 \tag{25}$$

und daraus wieder (17a)

$$\mathbf{v} = -\,\mathbf{G}_\mathbf{b}^{-1}\mathbf{B}^T\boldsymbol{\alpha}\,. \tag{26}$$

Dieses Ergebnis setzen wir in (23) ein und erhalten

$$\boldsymbol{\alpha} = (\mathbf{B}\,\mathbf{G}_\mathbf{b}^{-1}\mathbf{B}^T)^{-1}(\mathbf{A}\,\Delta\mathbf{x} + \mathbf{c}) = \mathbf{G}_\mathbf{B}(\mathbf{A}\,\Delta\mathbf{x} + \mathbf{c}) \tag{27}$$

Die Differentiation von M nach $\Delta\mathbf{x}$ liefert ausgehend von (24)

$$\frac{dM}{d\Delta\mathbf{x}} = 2\,\boldsymbol{\alpha}^T\mathbf{A} = 0 \tag{28}$$

liefert zusammen mit (27) die Bestimmungsgleichung für $\Delta\mathbf{x}$:

$$2\,\mathbf{A}^T\mathbf{G}_\mathbf{B}(\mathbf{A}\,\Delta\mathbf{x} + \mathbf{c}) = 0 \tag{30}$$

woraus sich die Lösung

$$\Delta\mathbf{x} = -\,(\mathbf{A}^T\mathbf{G}_\mathbf{B}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{G}_\mathbf{B}\,\mathbf{c} \tag{31}$$

tatsächlich in der oben erwähnten Analogie zum Fall der „vermittelnden Beobachtungen" ergibt. Auch für M läßt sich schreiben

$$M = (\mathbf{B}\,\mathbf{v})^T\mathbf{G}_\mathbf{B}(\mathbf{B}\,\mathbf{v})\,.$$

Als Anzahl der Freiheitsgrade erhalten wir $n_\mathbf{f} - n_\mathbf{x}$.

Die unter V. und VI. beschriebenen Ausgleichungsverfahren lassen sich nun ohne Schwierigkeiten in das eben erhaltene Schema einordnen. Sämtliche dort erhaltenen Ergebnisse erhält man auch aus (23) bis (31), wenn für die Matrizen die Spezialformen eingeführt werden: Für den Fall der vermittelnden Beobachtungen $\mathbf{B} = \mathbf{E}$ (Einheitsmatrix), für den Fall der bedingten Beobachtungen ein $\mathbf{A}$ vom Typ $(n; 0)$, d. h. es existieren keine Unbekannten. Auch die Zahl der Freiheitsgrade resultiert zwanglos aus diesen Vereinfachungen des allgemeinen Falles: Für $\mathbf{B} = \mathbf{E}$ ist die Zahl der Gleichungen gleich der (gewöhnlich irrelevanten) Zahl der Beobachtungen, im anderen Fall ist die Anzahl der Unbekannten Null. Aus den Fehlergleichungen wird bei dieser Betrachtungsweise lediglich eine spezielle Form von Bedingungsgleichungen.

Wir betrachten noch kurz die Lösbarkeitsbedingungen des Ansatzes (23). Die Normalgleichungen für α enthalten Skalarprodukte von Zeilen aus $\mathbf{B}$ und $\mathbf{B}\mathbf{G}_\mathfrak{b}^{-1}$. Die Zeilen müssen also linear unabhängig sein und dürfen nicht gleichzeitig lauter Nullelemente enthalten. Überdies muß $\mathbf{B}$ wenigstens dieselbe Anzahl von Spalten wie Zeilen haben, d. h. die Zahl der voneinander unabhängigen Beobachtungen muß wenigstens gleich sein der Zahl von Bedingungsgleichungen *). Gleiches wie für die Zeilen von $\mathbf{B}$ ergibt sich aus den Normalgleichungen der $\Delta\mathbf{x}$ für die Spalten von $\mathbf{A}$. Die eingeführten Unbekannten müssen unabhängig und ihre Zahl darf höchstens gleich der Zahl der Bedingungsgleichungen sein.

Für die ausgeglichenen Werte sind noch die zugehörigen Korrelationsmatrizen abzuleiten. Hierzu stellen wir wieder die $\Delta\mathbf{x}$ und $\mathfrak{b} + \mathbf{v}$ als Funktionen der $\mathfrak{b}$ dar und wenden (4), (4a) an. Zunächst erhalten wir aus (31) und der Definition von $\mathbf{c}$

$$\frac{d\Delta\mathbf{x}}{d\mathfrak{b}} = -(\mathbf{A}^T\mathbf{G}_\mathbf{B}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{G}_\mathbf{B}\frac{d\mathbf{c}}{d\mathfrak{b}} = -(\mathbf{A}^T\mathbf{G}_\mathbf{B}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{G}_\mathbf{B}\mathbf{B} \tag{32}$$

woraus resultiert

$$\mathbf{G}_{\Delta\mathbf{x}}^{-1} = (\mathbf{A}^T\mathbf{G}_\mathbf{B}\mathbf{A})^{-1}. \tag{33}$$

Weiter ergibt (26) bzw. (27)

$$\frac{d(\mathfrak{b}+\mathbf{v})}{d\mathfrak{b}} = \mathbf{E} + \frac{d\mathbf{v}}{d\mathfrak{b}} = \mathbf{E} - \mathbf{G}_\mathfrak{b}^{-1}\mathbf{B}^T\mathbf{G}_\mathbf{B}\left(\frac{d\mathbf{c}}{d\mathfrak{b}} + \mathbf{A}\frac{d\Delta\mathbf{x}}{d\mathfrak{b}}\right) = \tag{34}$$

$$= \mathbf{E} - \mathbf{G}_\mathfrak{b}^{-1}\mathbf{B}^T\mathbf{G}_\mathbf{B}\mathbf{B} + \mathbf{G}_\mathfrak{b}^{-1}\mathbf{B}^T\mathbf{G}_\mathbf{B}\mathbf{A}(\mathbf{A}^T\mathbf{G}_\mathbf{B}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{G}_\mathbf{B}\mathbf{B}$$

woraus nach einiger Matrizenalgebra folgt

$$\mathbf{G}_{(\mathfrak{b}+\mathbf{v})}^{-1} = \mathbf{G}_\mathfrak{b}^{-1} - \mathbf{G}_\mathfrak{b}^{-1}\mathbf{B}^T\mathbf{G}_\mathbf{B}\mathbf{B}\mathbf{G}_\mathfrak{b}^{-1} + \mathbf{G}_\mathfrak{b}^{-1}\mathbf{B}^T\mathbf{G}_\mathbf{B}\mathbf{A}(\mathbf{A}^T\mathbf{G}_\mathbf{B}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{G}_\mathbf{B}\mathbf{B}\mathbf{G}_\mathfrak{b}^{-1}. \tag{35}$$

Die abgeleiteten Korrelationsmatrizen (33) und (35) entsprechen bei Einführung der oben erwähnten Sonderfälle für die klassischen Fälle der Ausgleichungsrechnung den Ausdrücken (13) und (14) bzw. (20). Führt man übrigens ein nichtsinguläres $\mathbf{A}$ quadratischen Typs ein, d. h. ebensoviele Unbekannte wie Bedingungsgleichungen vorhanden sind, so ergibt sich $\mathbf{v} \equiv 0$ und $\mathbf{G}_{(\mathfrak{b}+\mathbf{v})}^{-1} = \mathbf{G}_\mathfrak{b}^{-1}$, wie zu erwarten ist. Es ist nicht so leicht wie in den Abschnitten V. und VI., zu zeigen, daß auch hier $\mathbf{G}_{(\mathfrak{b}+\mathbf{v})}^{-1}$ singulär ist mit einem Rangdefekt, der genau gleich ist der Anzahl der Freiheitsgrade. Um die dort gemachten kurzen Andeutungen zu einem allgemeinen Beweis zu erweitern, müssen wir etwas ausführlicher auf das Problem eingehen. Mathematische Hilfsmittel sind wieder [1] und [9]. Zunächst ersetzen wir den Rang von $\mathbf{G}_{(\mathfrak{b}+\mathbf{v})}^{-1}$ durch den von

$$\mathbf{D} = \mathbf{G}_{(\mathfrak{b}+\mathbf{v})}^{-1}\mathbf{G}_\mathfrak{b} = \frac{d(\mathfrak{b}+\mathbf{v})}{d\mathfrak{b}},$$

der dem von $\mathbf{G}_{(\mathfrak{b}+\mathbf{v})}^{-1}$ gleich ist ($\mathbf{G}_\mathfrak{b}$ ist nicht singulär). Aus $\mathbf{D}^2 = \mathbf{D}$ ergibt sich, daß alle Eigenwerte λ_i von $\mathbf{D}$ Null oder Eins sind, da für die Eigenvektoren $\mathbf{y}_i$ die allgemeine Beziehung $\mathbf{D}^2\mathbf{y}_i = \lambda_i^2\mathbf{y}_i$ gilt. Nun ist die Summe der Eigenwerte einer Matrix gleich ihrer Spur; in unserem Fall auch gleich dem Rang. Da $\mathbf{D} = \mathbf{D}_1 - \mathbf{D}_2 + \mathbf{D}_3$ (Gleichung (34)) können wir für jedes $\mathbf{D}_i$ die Spur getrennt ermitteln und erhalten $Sp(\mathbf{D}) = Sp(\mathbf{D}_1) - Sp(\mathbf{D}_2) + Sp(\mathbf{D}_3)$. Außerdem gilt für jedes i wieder $(\mathbf{D}_i)^2 = \mathbf{D}_i$. Wir gehen also zurück auf die Ermittlung des Ranges der $\mathbf{D}_i$ und erhalten:

$$\text{Rang}(\mathbf{D}_1) = \text{Rang}(\mathbf{E}) = n_\mathfrak{b}$$
$$\text{Rang}(\mathbf{D}_2) = \text{Rang}(\mathbf{G}_\mathfrak{b}^{-1}\mathbf{B}^T\mathbf{G}_\mathbf{B}\mathbf{B}) = n_\mathfrak{f}$$

---

*) Bedingungsgleichungen nur zwischen Unbekannten verlangen also eine Sonderbehandlung. Hierzu folgt man vorteilhaft der Methode in zwei Schritten nach [7] und spaltet diese Bedingungen der Form $\bar{\mathbf{A}}\Delta\mathbf{x} + \bar{\mathbf{c}} = 0$ ab. Man berechnet nach (31) ein $\Delta\bar{\mathbf{x}}$ und erweitert dann die „rechte Seite" $-\mathbf{A}^T\mathbf{G}_\mathbf{B}\mathbf{c}$ von (30) um $-\bar{\mathbf{A}}^T[\bar{\mathbf{A}}(\mathbf{A}^T\mathbf{G}_\mathbf{B}\mathbf{A})^{-1}\bar{\mathbf{A}}^T]^{-1}(\bar{\mathbf{A}}\Delta\bar{\mathbf{x}} + \bar{\mathbf{c}})$. Die nochmalige Auflösung für $\Delta\mathbf{x}$ ergibt die endgültigen Werte. Vergleiche die ausführliche Darstellung in [10].

(da wegen Rang $(\mathbf{x}\mathbf{y}) \leqq \min$ (Rang $(\mathbf{x})$, Rang $(\mathbf{y})$) $n_\mathfrak{f}$ der maximale Rang für $\mathbf{D}_2$ ist, andererseits durch $\mathbf{B}\mathbf{D}_2 = \mathbf{B}$ genau $n_\mathfrak{f}$ Eigenwerte zu 1 bestimmt sind und $n_\mathfrak{f}$ daher auch Minimalrang ist.

$$\text{Rang } (\mathbf{D}_3) = \text{Rang} (\mathbf{G}_\mathfrak{b}^{-1} \mathbf{B}^T \mathbf{G}_\mathbf{B} \mathbf{A} (\mathbf{A}^T \mathbf{G}_\mathbf{B} \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{G}_\mathbf{B} \mathbf{B}) = n_\mathfrak{x}$$

(da wie oben der Rang höchstens $n_\mathfrak{x}$ sein kann und durch $\mathbf{A}^T \mathbf{G}_\mathbf{B} \mathbf{B} \mathbf{D}_3 = \mathbf{A}^T \mathbf{G}_\mathbf{B} \mathbf{B}$ wieder gerade $n_\mathfrak{x}$ Eigenwerte $= 1$ gegeben sind).

Unser Gesamtergebnis ist also

$$\text{Rang } (\mathbf{G}_{(\mathfrak{b}+\mathfrak{v})}^{-1}) = n_\mathfrak{b} - n_\mathfrak{f} + n_\mathfrak{x} .$$

Von Interesse sind in manchen Fällen auch die Korrelationen zwischen den $\Delta\mathfrak{x}$ und $\mathfrak{b} + \mathfrak{v}$, also mit (33) und (35) die Korrelationsmatrix für alle ausgeglichenen Größen. Man erhält sie anschaulich, indem man aus den Elementen von $\mathfrak{b} + \mathfrak{v}$ und $\Delta\mathfrak{x}$ einen Vektor aufbaut und die Beziehung mittels (32) und (34) auf die $\mathfrak{b}$ zurückführt.

Man erhält allgemein für zwei Vektoren $\mathfrak{x}$, $\mathfrak{y}$

$$\mathbf{K}_{(\mathfrak{x},\mathfrak{y})} = \left(\frac{d\mathfrak{x}}{d\mathfrak{b}}\right) \mathbf{G}^{-1} \left(\frac{d\mathfrak{y}}{d\mathfrak{b}}\right)^T \tag{36}$$

und in unserem Fall

$$\mathbf{K}_{(\mathfrak{b}+\mathfrak{v},\, \Delta\mathfrak{x})} = - \mathbf{G}_\mathfrak{b}^{-1} \mathbf{B}^T \mathbf{G}_\mathbf{B} \mathbf{A} (\mathbf{A}^T \mathbf{G}_\mathbf{B} \mathbf{A})^{-1} . \tag{37}$$

Die gesamte oben erwähnte Korrelationsmatrix hat das Aussehen

$$\mathbf{G}_{(\mathfrak{b}+\mathfrak{v},\, \Delta\mathfrak{x})}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{G}_{(\mathfrak{b}+\mathfrak{v})}^{-1} & \mathbf{K}_{(\mathfrak{b}+\mathfrak{v},\, \Delta\mathfrak{x})} \\ \mathbf{K}_{(\mathfrak{b}+\mathfrak{v},\, \Delta\mathfrak{x})}^T & \mathbf{G}_{\Delta\mathfrak{x}}^{-1} \end{pmatrix} \tag{38}$$

Die Matrizen (33), (35) und (37) scheinen auf den ersten Blick äußerst lange Ausdrücke zu sein, sind jedoch aus wenigen Teilmatrizen aufgebaut, die schon im Verlauf der Rechnung auftreten. Zudem werden ja Korrelationen erst nach Abschluß und Prüfung der gesamten Ausgleichung berechnet und keinesfalls innerhalb des Iterationszyklus.

VIII.

Das eben gegebene Stichwort „Prüfung der Ausgleichung“ bedarf noch einer Erklärung; während man sich bei Handrechnung gewöhnlich mit schrittweisen Rechenkontrollen und der M-Probe analog (12) bzw. (12′) oder (19a) zufrieden gibt und bei iterativer Verbesserung die Änderungen von Schritt zu Schritt beurteilt, kann ein automatisch arbeitendes Programm jedenfalls noch tiefergreifende Prüfungen der Ergebnisse enthalten.

Handelt es sich um lineare Bedingungsgleichungen, so sind $\mathbf{A}$ und $\mathbf{B}$ von $\Delta\mathfrak{x}$ und $\mathfrak{v}$ unabhängig und die Prüfung hat sich prinzipiell tatsächlich nur auf richtige Rechnung im ersten Schritt zu erstrecken. Die M-Probe kann allgemein formuliert werden

$$M = \mathfrak{v}^T \mathbf{G}_\mathfrak{b} \mathfrak{v} = \boldsymbol{\alpha}^T (\mathbf{A} \Delta\mathfrak{x} + \mathfrak{c}) \tag{39}$$

und gibt eine gute Kontrolle für grobe Rechenfehler und auch für schlecht konditionierte Normalgleichungen. Es empfiehlt sich, diesen von der Linearitätsbedingung unabhängigen Test auch bei iterativer Anwendung der Formeln durchzuführen. Ein gutes Kriterium ist ein Zusammenstimmen der beiden Werte auf 10^{-4} (relativ), wobei jedoch für den Fall $M \equiv 0$ (quadratisches nichtsinguläres $\mathbf{A}$) eigens ein Absolutwert-Test vorgeschaltet werden muß.

Im Fall der Nichtlinearität verprobt man auf diese einfache Weise zwar den einzelnen Iterationsschritt, es bleibt aber die Frage, ob die eben abgeschlossene Iteration ein befriedigendes Ergebnis gebracht hat. Wir suchen also nach Ausgangskriterien für den Iterationszyklus.

Eines der wichtigsten ist zweifellos die Erfüllung der Bedingungsgleichungen, die ja jeweils nur in linearisierter Form zur Erfüllung gebracht werden. Der Betrag des Residuenvektors $|\mathfrak{f}|$ (= Betrag der noch vorhandenen Widersprüche) ist nur in besonderen Fällen

eine sinnvolle Testgröße, da die Bedingungsgleichungen ja ganz verschiedenen Ursprungs sein können und dann zeilenweise völlig andere Gewichte zugeordnet werden müssen. Bestimmen wir eine Gewichtsmatrix aus

$$\left[\left(\frac{d\mathfrak{f}}{d\mathfrak{b}}\right) G_{\mathfrak{b}}^{-1} \left(\frac{d\mathfrak{f}}{d\mathfrak{b}}\right)^T\right]^{-1} = (\mathbf{B}\, G_{\mathfrak{b}}^{-1} \mathbf{B}^T)^{-1} = G_{\mathbf{B}} \tag{40}$$

so gibt

$$\delta\mathfrak{f} = \{\mathfrak{f}^T G_{\mathbf{B}} \mathfrak{f}\}^{1/2} \tag{40a}$$

eine erste brauchbare Testgröße, für die bei richtiger Fehlerzuordnung eine Grenze 10^{-4} eingeführt werden kann. Ein sinnvoller Ansatz vorausgesetzt konvergiert $\delta\mathfrak{f}$ sehr rasch und läßt sich bis zur Rechengenauigkeit herunterdrücken.

Mehr statistische Bedeutung hat die Korrelationsmatrix

$$G_{\mathfrak{f}}^{-1} = \left(\frac{d\mathfrak{f}}{d(\mathfrak{b}+\mathfrak{v})} \quad \frac{d\mathfrak{f}}{d\Delta\mathfrak{x}}\right) G_{(\mathfrak{b}+\mathfrak{v},\,\Delta\mathfrak{x})}^{-1} \left(\frac{d\mathfrak{f}}{d(\mathfrak{b}+\mathfrak{v})} \quad \frac{d\mathfrak{f}}{d\Delta\mathfrak{x}}\right)^T = (\mathbf{B}\ \mathbf{A}) \begin{pmatrix} G_{(\mathfrak{b}+\mathfrak{v})}^{-1} & \mathbf{K} \\ \mathbf{K}^T & G_{\Delta\mathfrak{x}}^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{B}^T \\ \mathbf{A}^T \end{pmatrix} \tag{41}$$

(angeschrieben als Matrizen von Matrizen). Dabei sind $G_{(\mathfrak{b}+\mathfrak{v})}^{-1}$, $\mathbf{K}$ und $G_{\Delta\mathfrak{x}}^{-1}$ nach (33), (35) und (37) von der zuletzt durchgeführten Iteration ν zu nehmen, $\mathbf{B}$ und $\mathbf{A}$ in (41) müssen jedoch bereits an der Stelle $\mathfrak{b} + \mathfrak{v}_{\nu+1}$, $\mathfrak{x}_{\nu+1}$ abgeleitet sein. Andernfalls ergäbe sich $G_{\mathfrak{f}}^{-1} \equiv 0$. Die Diagonalglieder von $G_{\mathfrak{f}}^{-1}$ geben die $\overline{\sigma_i \sigma_i}$ für die Komponenten von $\mathfrak{f}$ nach dem Schritt ν entsprechend der Definition (4a) f. Die Untersuchung von $G_{\mathfrak{f}}^{-1}$ nach jedem Schritt würde jedoch die Rechenzeit auch bei schnellsten Anlagen erheblich verlängern. — Allein mit der Erfüllung der Bedingungsgleichungen kann sich eine strenge Prüfung noch nicht zufrieden geben, vielmehr bedarf auch die zweite in die Rechnung eingeführte Bedingung (M = Minimum) der Prüfung. Wir prüfen also die Ableitungen von M nach $\mathfrak{b} + \mathfrak{v}$ und $\mathfrak{x}$, die bei der endgültigen Lösung verschwinden müssen.

Wir definieren

$$\begin{aligned} \delta M_1 &= \left\{\sum_{ij} \left(\frac{\partial M}{\partial(\mathfrak{b}+\mathfrak{v})_i}\, \bar{\sigma}_{(\mathfrak{b}+\mathfrak{v})_i}\right) \left(\frac{\partial M}{\partial(\mathfrak{b}+\mathfrak{v})_j}\, \bar{\sigma}_{(\mathfrak{b}+\mathfrak{v})_j}\right)\right\}^{1/2} \\ \delta M_2 &= \left\{\sum_{ij} \left(\frac{\partial M}{\partial \mathfrak{x}_i}\, \bar{\sigma}_{\Delta\mathfrak{x}_i}\right) \left(\frac{\partial M}{\partial \mathfrak{x}_j}\, \bar{\sigma}_{\Delta\mathfrak{x}_j}\right)\right\}^{1/2} \end{aligned} \tag{41a}$$

wobei i, j Elemente aus den entsprechenden Vektoren bezeichnen und $\bar{\sigma}\bar{\sigma} = \overline{\sigma\sigma}$ nach (4a) f. Eigentlich wäre es nötig, auch noch die Korrelationen zwischen den $\Delta\mathfrak{x}$ und $\mathfrak{b} + \mathfrak{v}$ zu berücksichtigen; jedoch ist bereits die exakte Durchführung von (41a) langwierig und man beschränkt sich vorteilhaft sogar auf eine Näherung für δM_1 und schreibt

$$\begin{aligned} \delta M_1 &= \left\{\left(\frac{dM}{d(\mathfrak{b}+\mathfrak{v})}\right) G_{\mathfrak{b}}^{-1} \left(\frac{dM}{d(\mathfrak{b}+\mathfrak{v})}\right)^T\right\}^{1/2} \\ \delta M_2 &= \left\{\left(\frac{dM}{d\mathfrak{x}}\right) G_{\Delta\mathfrak{x}}^{-1} \left(\frac{dM}{d\mathfrak{x}}\right)^T\right\}^{1/2} \end{aligned} \tag{41b}$$

wobei $G_{(\mathfrak{b}+\mathfrak{v})}^{-1}$ durch $G_{\mathfrak{b}}^{-1}$ ersetzt wurde und damit das Kriterium strenger wird, da

$$G_{\mathfrak{b}}^{-1} - G_{(\mathfrak{b}+\mathfrak{v})}^{-1} = G_{\mathfrak{v}}^{-1}$$

und somit positiv definit ist.

Führen wir die Differentiationen durch, so erhalten wir entsprechend (25)

$$\left(\frac{dM}{d(\mathfrak{b}+\mathfrak{v})}\right)^T = \left(\frac{dM}{d\mathfrak{v}}\right)^T = 2\, G_{\mathfrak{b}}\, \mathfrak{v} + 2\, \mathbf{B}^T \boldsymbol{\alpha} \qquad (\mathbf{B} = \mathbf{B}_{\nu+1}!)$$

und mit (26)

$$\left(\frac{dM}{d(\mathfrak{b}+\mathfrak{v})}\right)^T = 2\,(\mathbf{B}_{\nu+1} - \mathbf{B}_\nu)^T \boldsymbol{\alpha} \tag{42}$$

was keinen besonderen Rechenaufwand verlangt.

Ähnlich benutzen wir (30) und erhalten

$$\left(\frac{\mathrm{d}M}{\mathrm{d}\mathfrak{x}}\right)^T = \left(\frac{\mathrm{d}M}{\mathrm{d}\Delta\mathfrak{x}}\right)^T = 2\,\mathbf{A}^T\,\mathfrak{G}_\mathbf{B}(\mathbf{A}\,\Delta\mathfrak{x} + \mathfrak{c}) = -\,2\,\mathbf{A}^T\,\mathfrak{G}_\mathbf{B}\,\mathbf{B}\,\mathfrak{v}\,. \tag{43}$$

Auch für δM_1 und δM_2 oder $\delta M = \sqrt{\delta M_1{}^2 + \delta M_2{}^2}$ lassen sich bei richtiger Anfangsannahme $\mathfrak{G}_\mathfrak{b}^{-1}$ numerische Werte vorschreiben, die jedoch vorteilhaft nicht kleiner als 10^{-4} liegen, da sonst zu viele unnütze Iterationen durchgeführt werden.

Die drei Größen $\delta\mathfrak{f}$, δM_1 und δM_2 prüfen ausreichend den zuletzt durchgeführten Schritt auf ein befriedigendes Ergebnis. Bei Nichterfüllung einer der gesetzten Bedingungen geht man in den nächsten Schritt, zählt aber die Anzahl von Schritten und läßt bei einer vorgeschriebenen Höchstzahl abbrechen (mit den vorgeschlagenen numerischen Werten erhält man bei sinnvollen Ausgangswerten selten mehr als 3—4 Iterationen). Um jedoch diesen Fall der Unlösbarkeit gegebenenfalls abzukürzen und gleichzeitig weitere Rechenkontrollen einzubauen, kann die Konvergenz von $\delta\mathfrak{f}$ und δM geprüft werden, d. h. jeder dieser Werte muß von Schritt zu Schritt kleiner werden. Ein sofortiges Abbrechen bei einmaliger Nicht-Konvergenz empfiehlt sich jedoch nicht, da diese oft scheinbar ist und numerische Ursachen hat. Für die Größe M ist eine Konvergenzprüfung unsinnig, solange die Bedingungsgleichungen nicht hinreichend erfüllt sind. Numerische Beispiele zeigten, daß sich selbst nach Erfüllen der Bedingungsgleichungen entsprechend dem gegebenen $\delta\mathfrak{f}$-Zahlenwert M noch nicht genügend gut entlang der Kurve bewegte, deren Minimum gesucht ist. Es empfiehlt sich, δM-Werte und δM-Konvergenz erst nach Erfüllung der Bedingungsgleichungen zu berechnen und zu testen.

IX.

Abschließend sollen die nötigen Formeln zur Lösung des allgemeinsten Falles der Ausgleichungsrechnung in geschlossener Form angeschrieben werden.

Wir beginnen mit Beobachtungen $\mathfrak{b}$, einer Korrelationsmatrix $\mathfrak{G}_\mathfrak{b}^{-1}$, einer ersten Näherung $\mathfrak{v}_{\nu=0} = 0$, Näherungen für Unbekannte $\bar{\mathfrak{x}}_0$, einer allgemeinen Funktion $\mathfrak{f}$ und deren Ableitungen in Matrizenform nach $\mathfrak{x}$ und $\mathfrak{b}$. Diese Ableitung kann u. U. numerisch erfolgen, d. h. in die dem Ausgleichungsprogramm zugehörige Routine zur Berechnung von $\mathfrak{f}$ wird mit jeweils einer geänderten Komponente $\bar{\mathfrak{x}}_{\nu i} + \Delta\mathfrak{x}_i$ oder $\mathfrak{b}_i = \mathfrak{v}_{\nu i} + \Delta\mathfrak{b}_i$ eingegangen und eine Spalte von $\mathbf{A}$ oder $\mathbf{B}$ aus $(1/\Delta\mathfrak{x}_i)\,\Delta\mathfrak{f}$ oder $(1/\Delta\mathfrak{b}_i)\,\Delta\mathfrak{f}$ erhalten. Eventuell durchläuft man diesen Zyklus zweimal und ändert dazwischen die Zeichen der $\Delta\mathfrak{x}_i$, $\Delta\mathfrak{b}_i$; die zwei Spalten werden dann gemittelt. Die Größen Δ, für die $\mathfrak{f}$ als linear betrachtet werden kann, müssen im Fall der numerischen Differentiation als Ausgangsinformation erwartet werden. Die analytische Berechnung von $\mathbf{A}$ und $\mathbf{B}$ ist zweifellos schneller. Siehe [5] und [8] zur numerischen Differentiation.

Für einen Iterationsschritt haben wir die Rechenschritte (ohne Rücksicht auf Wiederverwendbarkeit von Zwischenergebnissen):

Lösungen

$$\mathfrak{f} = \mathfrak{f}(\bar{\mathfrak{x}}_\nu, \mathfrak{b} + \mathfrak{v}_\nu)$$

$$\mathbf{A} = \left(\frac{\mathrm{d}\mathfrak{f}}{\mathrm{d}\mathfrak{x}}\right)_{\mathfrak{x}=\bar{\mathfrak{x}}_\nu}$$

$$\mathbf{B} = \left(\frac{\mathrm{d}\mathfrak{f}}{\mathrm{d}\mathfrak{b}}\right)_{\mathfrak{b}=\mathfrak{b}+\mathfrak{v}_\nu}$$

$$\mathfrak{c} = \mathfrak{f} - \mathbf{B}\,\mathfrak{v}_\nu$$

$$\mathfrak{G}_\mathbf{B}^{-1} = \mathbf{B}\,\mathfrak{G}_\mathfrak{b}^{-1}\,\mathbf{B}^T$$

$$\Delta\mathfrak{x}_{\nu+1} = -\,(\mathbf{A}^T\,\mathfrak{G}_\mathbf{B}\,\mathbf{A})^{-1}\,\mathbf{A}^T\,\mathfrak{G}_\mathbf{B}\,\mathfrak{c}$$

$$\mathfrak{a} = \mathfrak{G}_\mathbf{B}\,\mathbf{A}\,\Delta\mathfrak{x} + \mathfrak{G}_\mathbf{B}\,\mathfrak{c}$$

$$\mathfrak{v}_{\nu+1} = -\,\mathfrak{G}_\mathfrak{b}^{-1}\,\mathbf{B}^T\mathfrak{a}\,.$$

Fehlerrechnung

$$M_{\nu+1} = \mathbf{v}_{\nu+1}^T \, \mathbf{G_b} \, \mathbf{v}_{\nu+1}$$

$$\mathbf{G}_{\Delta \mathbf{x}}^{-1} = (\mathbf{A}^T \mathbf{G_B} \mathbf{A})^{-1}$$

$$\mathbf{G}_{(\mathbf{b}+\mathbf{v})}^{-1} = \mathbf{G_b}^{-1} - \mathbf{G_b}^{-1} \mathbf{B}^T \mathbf{G_B} \mathbf{B} \mathbf{G_b}^{-1} + \mathbf{G_b}^{-1} \mathbf{B}^T \mathbf{G_B} \mathbf{A} (\mathbf{A}^T \mathbf{G_B} \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{G_B} \mathbf{B} \mathbf{G_b}^{-1}$$

$$\mathbf{K}_{(\mathbf{b}+\mathbf{v}, \Delta \mathbf{x})} = - \mathbf{G_b}^{-1} \mathbf{B}^T \mathbf{G_b} \mathbf{A} (\mathbf{A}^T \mathbf{G_B} \mathbf{A})^{-1} .$$

Prüfung

a) Iterationsschritt

$$\frac{1}{M} \left| \mathbf{v}^T \mathbf{G_b} \mathbf{v} - \boldsymbol{\alpha}^T (\mathbf{A} \, \Delta \mathbf{x} + \mathbf{c}) \right| \leqq \varepsilon_1$$

$$\delta \mathfrak{f}_\nu - \delta \mathfrak{f}_{\nu+1} \geqq 0$$

$$(\delta M_\nu - \delta M_{\nu+1} \geqq 0)$$

b) Abschluß

$$\delta \mathfrak{f} = \{ \mathfrak{f}^T \mathbf{G_B} \mathfrak{f} \}^{1/2} \leqq \varepsilon_2$$

$$\delta M_1 = 2 \{ \mathbf{d}_1^T \mathbf{G_b}^{-1} \mathbf{d}_1 \}^{1/2} \quad \text{mit} \quad \mathbf{d}_1 = (\mathbf{B}_{\nu+1} - \mathbf{B}_\nu)^T \boldsymbol{\alpha}$$

$$\delta M_2 = 2 \{ \mathbf{d}_2^T (\mathbf{A}^T \mathbf{G_B} \mathbf{A})^{-1} \mathbf{d}_2 \}^{1/2} \quad \text{mit} \quad \mathbf{d}_2 = \mathbf{A}^T \mathbf{G_B} \mathbf{B} \mathbf{v}$$

$$\delta M = \{ \mathrm{d} M_1{}^2 + \mathrm{d} M_2{}^2 \}^{1/2} \leqq \varepsilon_3 .$$

Literatur

[1] BODEWIG, E.: Matrix Calculus, Amsterdam 1959.

[2] FISHER, R. A.: Statistical Methods for Research Workers, London 1954.

[3] GOTTHARDT, E.: Ableitung der Grundformeln der Ausgleichungsrechnung mit Hilfe der Matrizenrechnung, Veröff. d. DGK A 4, 1952.

[4] GROSSMANN, W.: Grundzüge der Ausgleichungsrechnung, Springer 1953.

[5] KUNZ, K. S.: Numerical Analysis, McGraw Hill 1957.

[6] TIENSTRA, J. M.: The Foundation of the Calculus of Observations and the Method of Least Squares, Bull. Geod., 1948 Nr. 10. (In deutscher Übersetzung erschienen im wiss. Übersetzungsdienst der DGK, Nr. 3, München 1956.)

[7] TIENSTRA, J. M.: An Extension of the Technique of the Methods of Least Squares to Correlated Observations, Bull. Geod., 1947 Nr. 6. (In deutscher Übersetzung erschienen im wiss. Übersetzungsdienst der DGK, Nr. 9, München 1956.)

[8] WILLERS, FR. A.: Methoden der praktischen Analysis, Berlin 1957.

[9] ZURMÜHL, R.: Matrizen, Berlin 1958.

[10] LINKWITZ, K.: Über die Systematik verschiedener Formen der Ausgleichungsrechnung, ZfV Nr. 5, 6, 7 (1960).